

## 1<sup>η</sup> Εργασία - Γραμμική Παλινδρόμηση

Για την χημική αντίδραση  $A \rightarrow B$  που πραγματοποιείται στην υγρή φάση παρουσία καταλύτη, διεξάγονται 4 πειράματα με ελεγχόμενη θερμοκρασία. Σε εργαστηριακό πειραματικό αντιδραστήρα τοποθετείται αρχικά για κάθε πείραμα μόνο το αντιδρόν Α σε κάποια αρχική συγκέντρωση. Σύμφωνα με την κινητική της αντίδρασης η συγκέντρωση του προϊόντος Α πρέπει να μειώνεται με το χρόνο σύμφωνα με την ακόλουθη εξίσωση, όπου η σταθερά  $k$  θεωρείται μόνο συνάρτηση της θερμοκρασίας

$$C_A(g/L) = C_{A0} e^{-kt}$$

Τα πειραματικά δεδομένα δίδονται στον παρακάτω πίνακα:

	Πείραμα 1 T=100°C	Πείραμα 2 T=150°C	Πείραμα 3 T=200°C	Πείραμα 4 T=250°C
t(h)	$C_A(g/l)$			
0	105.145	104.095	104.247	105.351
1	87.228	68.740	67.958	61.527
2	67.261	51.583	37.834	33.807
3	61.527	33.538	23.325	20.460
4	46.446	25.047	18.200	14.188
5	37.217	13.582	14.273	9.339
6	33.663	10.050	5.733	7.286
7	26.569	11.029	4.928	5.918
8	20.480	4.488	4.340	3.965
9	22.708	8.220	4.280	1.559
10	19.906-0.05*a	6.810-0.05*a	6.358-0.05*a	6.350-0.05*a

- Αναπτύξτε κώδικα σε FORTRAN ή Matlab που να υλοποιεί τη μέθοδο της γραμμικής παλινδρόμησης.
- Χρησιμοποιείστε τον κώδικα για να προσδιορίσετε την τιμή της σταθεράς  $k$  σε κάθε θερμοκρασία.
- Παραστήστε και σχολιάστε την εξάρτηση της κινητικής σταθεράς με τη θερμοκρασία.

### Παρατηρήσεις

- Η εργασία είναι ατομική.** Ο παράγοντας  $a$  υπολογίζεται από τα 2 τελευταία ψηφία του κωδικού αριθμού του φοιτητή. Μόνο σε περίπτωση που δεν έχετε κωδικό και κατόπιν συνεννόησης με τον κ. Δογάνη, θα χρησιμοποιήσετε τον αριθμό που αντιστοιχεί στην ημέρα γέννησης σας, πχ. 19.
- Απορίες-Παράδοση λυμένων ασκήσεων**  
Για απορίες να απευθύνεστε στον κ. Φίλιππο Δογάνη, Γραφείο Η1.401 (416 με την παλιά αρίθμηση, στον διπλανό διάδρομο από το Υπολογιστικό Κέντρο) ή με e-mail στην διεύθυνση: [fdoganis@chemeng.ntua.gr](mailto:fdoganis@chemeng.ntua.gr), βάζοντας **υποχρεωτικά στο θέμα του μηνύματος «1<sup>η</sup> Εργασία ΑΣΧΜ»**. Η παράδοση των εργασιών θα γίνεται μόνο μέσω του συστήματος υποβολής εργασιών <http://weblab.chemeng.ntua.gr/submission.htm> στην επιλογή «Υπολογιστικά Θέματα».
- Προσοχή:** Να υποβάλετε συνολικά ένα αρχείο **κειμένου PDF** (PDF μπορείτε να παράγετε στο Υπολογιστικό Κέντρο της Σχολής επικολλώντας όλο το κείμενό σας και εκτυπώνοντας στον εκτυπωτή CutePDF Writer. Στο αναδυόμενο μενού επιλέγετε όνομα αρχείου και τοποθεσία αποθήκευσης.). Στο κείμενο της εργασίας να αναφέρετε το όνομα και τον κωδικό σας. Στο αρχείο να δείχνετε ανά ερώτημα:
  - τον **κώδικα** που σας ζητείται (ο κώδικας να έχει όλες τις παραμέτρους και να τρέχει **χωρίς να λαμβάνει δεδομένα από τον χρήστη**). Στον κώδικα **απαραίτητα να εξηγείτε με σχόλια** τον τρόπο σκέψης σας και την λειτουργία που επιτελούν οι κύριες γραμμές. Επίσης, να φαίνονται οι αριθμητικές τιμές που υπολογίζονται με εντολές εκτύπωσης μέσα από το πρόγραμμα, ώστε να φαίνεται η πορεία των υπολογισμών, όχι μόνο ένα αποτέλεσμα.
  - έναν **πίνακα** με τις υπολογιζόμενες τιμές του  $k$  και το  $R^2$  που υπολογίζετε ανά θερμοκρασία
  - τον **σχολιασμό** σας για την σχέση  $k$ -θερμοκρασίας.
- Προθεσμία παράδοσης εργασίας: 3/4/2017 12:00 το μεσημέρι.**